

実数型格子ガス法による熱流動解析に関する研究

A Heat Flow Simulation by the continuous-velocity lattice-gas Model

- 今川 洋造, 北陸先端大院, 〒 923-1292 石川県能美郡辰口町旭台 1-1, Email : y-imaga@jaist.ac.jp
 松澤 照男, 北陸先端大, 〒 923-1292 石川県能美郡辰口町旭台 1-1, Email : matuzawa@jaist.ac.jp
 Youzou IMAGAWA, School of Information Science, JAIST, Ishikawa 923-1292, JAPAN
 Teruo MATSUZAWA, Center for Information Science, JAIST, Ishikawa 923-1292, JAPAN

Lattice-gas method is a technique to analyze the fluid flow simulation by particle movement from microdynamics view. The movement of the particle is composed of the stream and the collision of the particle. Moreover, the velocity and the position of the particle are discrete. However, because the speed and position of the particle are discrete, the collision rule should be set to satisfy the isotropy of the particle movement. The continuous-velocity lattice-gas method with the speed in the real number was developed. By this method, particles have a velocity of real number. And particles collide by unique collision rule. Therefore, the equilibrium of the velocity of the particle is the Maxwell-Boltzmann distribution. In this research, we aims at the simulation and the consideration of the heat flow problem by the continuous-velocity lattice-gas method.

1. 緒言

格子ガス法は、差分法や有限要素法といった流体運動を数値的に解析する手法とは異なり、流れ場を規則的な格子で区切り、仮想的な粒子を運動させることにより、ミクロなレベルから流れ場を解析す非圧縮性流れの解析手法である。

この手法は、空間と速度を離散化するため、粒子の速度方向の制限、同一格子上には同じ速度を持つ粒子は存在しない、という排他則が生じる。そのため、粒子の衝突のルールに特別な配慮をする必要があり、また、3次元においては格子の対称性のため、複雑な格子を用いる必要がある等の問題点がある。

実数格子ガス法は A.Malevanets 氏によって提唱された非圧縮性流れ解析の手法(文献[1])である。この手法は従来の格子ガス法とは異なり、速度を実数値で持つ。また、衝突過程は同一格子上に存在する全ての粒子の運動量を、その重心の回りで回転させるという操作で記述される。この衝突過程の計算の容易さから、3次元計算への拡張が容易であるという特徴がある。

また、この手法の導出過程において、熱流動解析に必要なエネルギー方程式などが導出されている。適切な条件を与えることで、熱流動解析が出来るのではないかと考えることができる。

しかし、この手法による熱流動現象の具体的な計算を扱った研究は、まだなされていない。本研究では、この実数型格子ガス法による熱流動問題のシミュレートと、その考察を目的とする。

2. 実数型格子ガス法

実数型格子ガス法は、従来の格子ガス法と同様に、粒子の並進と衝突の過程を繰り返すことにより計算が進行する。また対象となる気体は、理想気体を仮定している。

2.1 衝突過程

同一格子上にある粒子同士が衝突を行い、運動量と運動エネルギーを交換するプロセスである。衝突過程において、運動量と運動エネルギーは保存される。衝突過程は、運動量の重心を中心として、各粒子への速度とのベクトルとの差を取り、その差をランダムな回転角で回転させることにより記述される。 \mathbf{v}_i と \mathbf{v}'_i を衝突前と衝突後の衝突粒子の速度、 \mathbf{V} は同一格子上の粒子の速度の平均とする。ランダムな回転行列 σ は格子毎に異なる。

$$\mathbf{v}'_i = \mathbf{V} + \sigma(\mathbf{v}_i - \mathbf{V})$$

また、ランダムな回転角 σ_j をベクトル \mathbf{v} に対して、 $(\mathbf{v}^T \sigma_j \mathbf{v}) = 0$ となるように決めるとき、ずり粘性係数

の値が最も小さくなり、高い Reynolds 数の流れをシミュレートすることが出来る。2次元の場合は、衝突の際の回転角を $\pm\pi/2$ とすればよい。

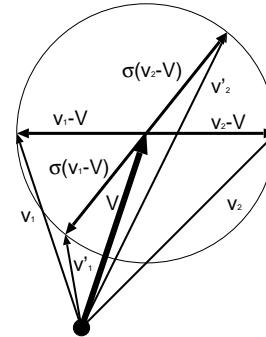


Fig. 1: Collision transformation for two particles in 2D

2.2 並進過程

粒子が格子から格子へと移動する過程である。1ステップ毎に粒子は速度分だけ移動する。衝突は格子上で行われるため、実数座標を整数座標に変換して、格子上に移動する必要がある。

整数座標 $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_D)$ (D は次元数) に存在する粒子が速度 $\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_D)$ を持つとき、速度成分 v_i を整数部分 $[v_i]$ と小数部分 $\{v_i\}$ に分離する。

$$v_i = [v_i] + \{v_i\}$$

移動後の座標 $\mathbf{x}' = (x'_1, \dots, x'_D)$ の成分は、 $[0, 1]$ の一様乱数 ξ_i を用いて

$$x'_i = \begin{cases} x_i + [v_i] & (\xi_i > \{v_i\}) \\ x_i + [v_i] + 1 & (\xi_i < \{v_i\}) \end{cases}$$

と表すことが出来る。

Fig.2 は2次元における例であり、 $A = \{v_x\}\{v_y\}$ が(a)に移動する確率、 $B = (1 - \{v_x\})\{v_y\}$ が(b)に移動する確率、 $C = (1 - \{v_x\})(1 - \{v_y\})$ が(c)に移動する確率、 $D = \{v_x\}(1 - \{v_y\})$ が(d)に移動する確率である。

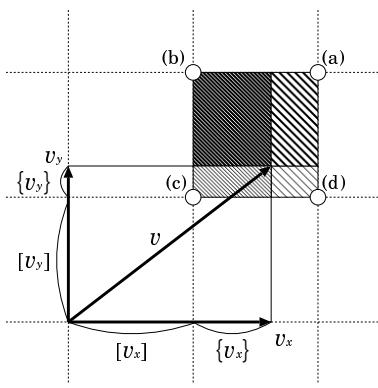


Fig. 2: Streaming transformation in 2D

2.3 平衡状態

以上の衝突側と並進側を用いることで、実数型格子ガス法では、平衡状態において粒子の速度分布が、Maxwell-Boltzmann 分布

$$f(v) = \left(1/(\sqrt{2\pi T})\right)^d \exp(\|v\|^2/2T)$$

に従う。 d は次元数である。これにより、実数型格子ガス法のシミュレートを行う際の粒子速度の初期条件として、この Maxwell-Boltzmann 分布に従う速度を与える。

3. 物理量

動粘性係数 ν は

$$\nu = \frac{1}{12} + T \frac{\rho + 1 - e^{-\rho}}{2(\rho - 1 + e^{-\rho})}$$

で与えられ、Reynolds 数は代表長さを L 、代表速度を U とすると $Re = LU/\nu$ となる。ここで、 T は体系の平均温度、 ρ は粒子の格子点あたりの平均数密度である。

また、動粘性係数を最小にする衝突を用いた場合、動粘性係数は ν_{min} は

$$\nu_{min} = \frac{1}{12} + T \frac{1 - e^{-\rho}}{2(\rho - 1 + e^{-\rho})}$$

となる。

今回は、1種類の粒子だけを扱うので、粒子の質量は 1 に正規化している。

粗視化格子 l における速度は、粗視化格子 l における粒子の密度と運動量を用いて

$$v(l) = \mu(l)/\rho(l)$$

となる。密度は格子 l 上にある粒子数、運動量は l 上にある粒子の速度成分の和として与えられる。

系内の温度は、全粒子の運動エネルギーの平均を用いて、系内粒子数を N とすると、2次元の場合

$$T = \frac{1}{N} \sum_i \frac{v_i^2}{2}$$

と与えられる。

流体の音速 c_s は、

$$c_s = \sqrt{\frac{5}{3}T}$$

で与えられる。

圧力は理想気体を仮定しているため、

$$p = \rho T_{local}$$

となる。

今回の計算では、粗視化格子における温度は、その格子内の平均流速から見た粒子速度を用いて、2次元の場合には

$$T_{local} = \frac{1}{2} \sum_{j \in l} (c_j - \bar{c})$$

と考えた。ここで \bar{c} は、粗視化格子における平均流速である。

4. 実数位置

この実数型格子ガス法は、ステップ毎に衝突を発生させる必要があるため、確率を用いて実数位置を整数位置（格子点）に移動させている。この衝突を発生させるための確率を用いる移動を行わずに、粒子が最寄りの格子点において衝突をして、粒子は位置を整数ではなく実数で格納するというルールを用いた場合でも、整数位置を用いた場合と物理量は変化しないという報告がなされている（文献[7]）。つまり Fig.3において、斜線部の内部にある粒子が中心の格子で衝突するというルールである。この移動ルールを用いることで、確率を用いて粒子を格子に移動させる計算が省略でき、粒子の移動過程での計算量が減り、計算速度が上がる利点がある。そのため本研究では、粒子の位置を実数位置でもつこのルールを採用した。

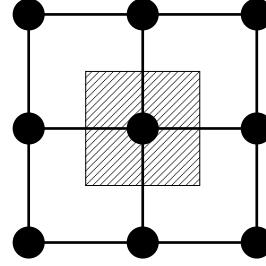


Fig. 3: Real position

5. 粗視化

従来の格子ガス法と同様に、空間平均をとることで、その地点での流れ場の物理量を表す。

空間平均には移動平均を適用した。平均をとる格子点を中心として、一辺 $2n+1$ の正方形領域内にある格子に存在する粒子について空間平均をとる。この平均の取り方は、境界付近では平均をとるための格子が少なくなるため、境界付近の物理量の十分な平均をとることができないという欠点がある。しかし、普通の空間平均に比べて、サンプル点を多くとることができるという利点がある。そのため、速度について調べる流れ場に関しては、この条件を使用している。

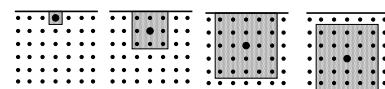


Fig. 4: Example : spacial average at n=2

格子ガス法は統計的なばらつき（ノイズ）が生じる。そのため、流れ場の平衡状態においては、必要であれば時間平均をとることにより、統計的ノイズを取り除くことができる。

6. 格子点の配置

実数型格子ガス法では、格子は正方格子を用いる。格子点については、境界上に格子点を配置した場合、境界上での物理量、例えば密度などが領域内の物理量に比べて低くなる。これにより、空間平均をとる際に影響をおよぼす可能性がある。そのため今回の計算では、境界においては、境界上に格子点を配置せず、Fig.5のように格子点で境界を挟むように格子点を配置した。

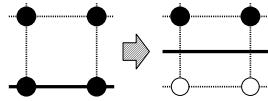


Fig. 5: Lattice point at boundary

7. 境界条件

格子ガス法において、境界条件の与え方は、流れ場の性格を決める重要な要素である。今回の計算においては、境界条件を以下のように考えた。

7.1 滑りなし境界条件

数値的解法の境界条件として、流体と壁面との間に摩擦があり、壁面における流速の垂直方向成分と水平方向成分がともに0になる境界条件がある。この境界条件は滑りなし(non-slip)境界条件として知られている。

実数型格子ガス法におけるこの境界条件は、これまでの格子ガス法と同様に、各々の速度成分を逆にするという滑りなし境界条件を用いることにより表現される。



Fig. 6: Non-slip boundary condition

7.2 温度を持つ壁

温度を持つ境界条件との衝突について、今回の計算では、動分子力学における壁面への衝突と同様の手法、つまりCosine法則に従う速度分布を粒子に与えた。これは、Maxwell分布に従う速度を持つ粒子が壁面に衝突すると、個体表面から散乱される粒子は $\cos\theta_r$ (θ_r は壁面表面から測った反射角 (Fig.6)) に比例する速度分布を与えられるという法則である。

この法則に従うような粒子速度を与えるために、温度 T を持つ壁から反射した境界に垂直な方向の速度 v の分布を

$$v = \frac{v}{T} \exp\left(-\frac{v^2}{2T}\right)$$

とし、水平な方向の速度 u の分布を

$$u = \frac{1}{\sqrt{2\pi T}} \exp\left(-\frac{u^2}{2T}\right)$$

に従うように速度を与えた。

境界が速度を持つ場合は、上記の温度壁により発生した粒子の速度に、境界の速度を加えればよい。

この境界においては、粒子が境界に付着し、境界の持つエネルギーに十分平衡し、衝突前の粒子の速度とは無関係に、等方的に反射するモデルである。つまりこの境界モデルは、粒子の速度が境界の影響を完全に反映するモデルである。

7.3 境界衝突後の粒子位置

境界と衝突して跳ね返った粒子の位置については、粒子と壁面との衝突が瞬間で起こるものと仮定し、1ステップの時間割合を考慮することにより、粒子位置を決定した。

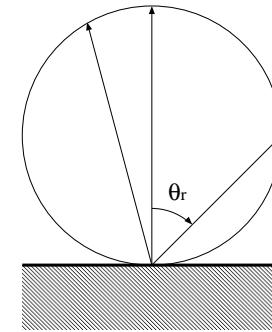


Fig. 7: Cosine Law

説明のため、境界は $y = L$ ($L > 0$) とし、 $t = t_0$ での粒子の位置を (x_0, y_0) 、速度を (c_x, c_y) とし、境界衝突後の粒子速度を (c'_x, c'_y) (但し, $c_y < L$) とする。普通は、1タイムステップ後の粒子の位置の y 座標は

$$y_1 = y_0 + c_y$$

となる。

$t = t_0$ から $t = t_0 + 1$ 間の粒子間の衝突は考慮しないが、境界との衝突は考慮する必要がある。境界と衝突した後の粒子位置は、

$$y_1 = L + c'_y \left(1 - \frac{L - y_0}{c_y}\right)$$

$$x_1 = x_0 + c_x \frac{y_0 - L}{c_y} + c'_x \left(1 - \frac{L - y_0}{c_y}\right)$$

となる。ここで、 $\frac{y-L}{c_y}$, $\left(1 - \frac{y-L}{c_y}\right)$ は、それぞれ衝突までの時間の割合、衝突後に移動する時間の割合を示している。

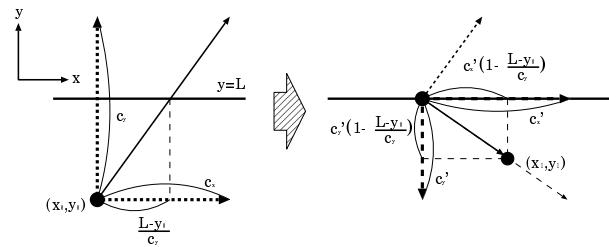


Fig. 8: Particle position

8. 計算結果

8.1 2次元クエット流れ

移動境界の効果を調べるために、クエット流れのシミュレーションを行った。左右境界は周期境界条件であり、上境界は温度 $T = 1.5$ とし、右方向に $v = 0.5$ の速度を与えた。下境界は滑りなし境界条件とした。各物理量7500から10000ステップの時間平均をとる。速度の分布をそれぞれ示す。

流れと垂直な方向に対して、速度の大きさが線形に変化するという解析解がある。解析解と比較しても、解がほぼ一致していることが確認できる。これにより、滑りなし境界条件と速度壁の条件が適当である、ということが確認できる。

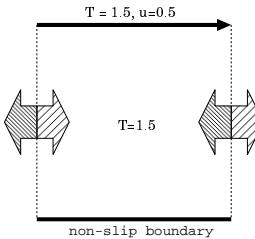


Fig. 9: Initial condition of quet flow

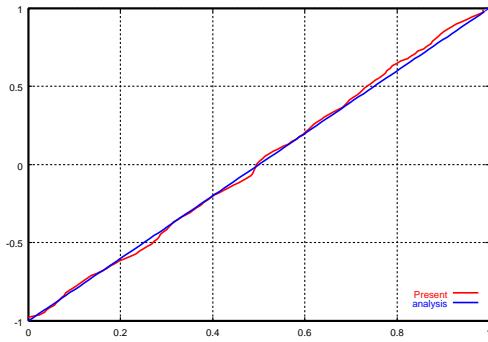


Fig. 10: Velocity profile of quet flow

8.2 2 次元キャビティ流れ

2次元キャビティ流れのシミュレーションを行った。上境界で、Maxwell-Boltzmann 分布に従う速度を粒子に与えている。その他の境界では、滑りなし境界条件を適用した。格子数は 256×256 、上境界の温度は $T = 1.45$ とし、水平方向に速度 0.5 を与えた。粒子の初期分布を決定するのに使用する温度 T は 1.45 とした。粒子の密度は、初期条件として一様に $\rho = 4$ とした。30000 ステップまで計算を行い、28000 から 30000 ステップの時間平均をとった。

時間平均をとった間の系全体の温度は、ほぼ $T = 1.5$ となっている。正確には、時間平均をとる間の温度の最大値は $T_{max} = 1.507$ 、最小値は $T_{min} = 1.499$ 、この間の時間平均をとった温度は、 $T = 1.503$ となっていた。この温度を用いて Reynolds 数の計算を行うと、 $Re \approx 100$ となる。この計算モデルにおける流速と音速の比であるマッハ数は、 $Ma \approx 0.3$ となっている。

流線図と中心における速度分布図を以下に示す。速度分布図については、比較のために現在最も精度が良いとされている GHIA 等の文献 [5] による $Re = 100$ の結果も合わせて記した。

時間平均と空間平均をとることにより、良好な結果が得られた。計算空間の左下に、2次渦の発生が確認できる。また、動粘性係数を最小にする衝突ルールを用いることで、他の条件を変更することなく、高い Reynolds 数の流れ場をシミュレートできる。この衝突ルールを用いて同じ計算を行った。Reynolds 数は $Re \approx 400$ となる。

$Re = 400$ の場合も 2 次渦が流線に現れた。速度の大きさを正規化して見ることで、小さな渦らしいものも確認することができた。このような小さな渦は、格子点を増やすことによって、明確に発生するであろうと思われる。

8.3 2 次元ベナール対流

ベナール対流のシミュレーションを行った。上の境界には $T = 1.0$ の温度壁、下の境界には $T = 2.0$ の温度壁、左右の境界には周期境界条件を適用した。格子数は 256×256 とし、空間平均は 8×8 の普通の空間平均をとる。58000 ステップから 60000 ステップにおいて、時間平均をとった。重力加速度は鉛直方向 $g = 0.005$ とし、粒子の鉛直方向速度を、ステップ毎に重力加速度だけ引

いている。

2つの対流が発生しているのが確認できる。温度分布を見ると、上部中心付近と下部の左右付近において、対流によって境界の温度が輸送されていることを見ることができる。

壁が持つ温度から得られるエネルギーのみで流れを形成するこのモデルでの流速は、粒子に流速を与えていたキャビティ流れに比べて、流速はとても小さい。

9. 結言

2次元クエット流れをシミュレートすることにより、滑りなし境界条件が有用であることが判明した。また、2次元キャビティ流れのシミュレートを行い、数値解法の結果と比較することにより、有効な結果が得られることが判った。

ベナール対流については、温度壁の境界条件と重力の影響により、対流が発生することが確認できた。

これから課題としては、熱伝導率を求め、具体的なレイリー数またはプランドル数についての熱流動の計算を行う必要がある。

また、流れ場のシミュレーションについても、音速と動粘性係数が温度に比例して大きくなっているため、非圧縮性を維持したまま、大きな Reynolds 数の流れ場を計算するためには、格子数を多くする必要がある。また、この手法は 3 次元への拡張が容易であるものの、計算のためにより多くの格子が必要である。この手法は、格子数と粒子数に比例して計算時間が増大するため多くの計算時間が必要になる。しかし、この手法における計算は陽的であり、計算を並列化することにより計算時間の短縮が比較的容易であると考えられる。

参考文献

1. A.Malevanets, "Statistical mechanics of hydrodynamic lattice gases" Thesis for the degree of Ph.D, Dept. of Chemistry, Univ. of Tronto(1997)
2. A.Malevanets, R.Kapral, "Continuous-velocity lattice-gas model of fluid flow" Europhys. Lett. **44** (5), pp. 552-558(1998)
3. 日本機械学会編, 「原子・分子の流れ-希薄気体力学とその応用-」 共立出版 (1996)
4. F.O.Goodman,H.Y.Wachman, "Dynamics of Gas-Surface Scattering" ACADEMIC PRESS(1976)
5. U.GHIA,K.N.GHIA, and C.T.SHIN "High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method" Journal of Computational Physics **48**, 387-411(1982)
6. 保原充, 大宮司久明「数值流体力学 - 基礎と応用」 東京大学出版会 (1992)
7. 橋本康弘他,「実数型格子ガス法を用いた3次元混相流解析」流体ミクロシミュレーションの大規模体系の適用研究 日本国原子力学会 報告書 (2000)

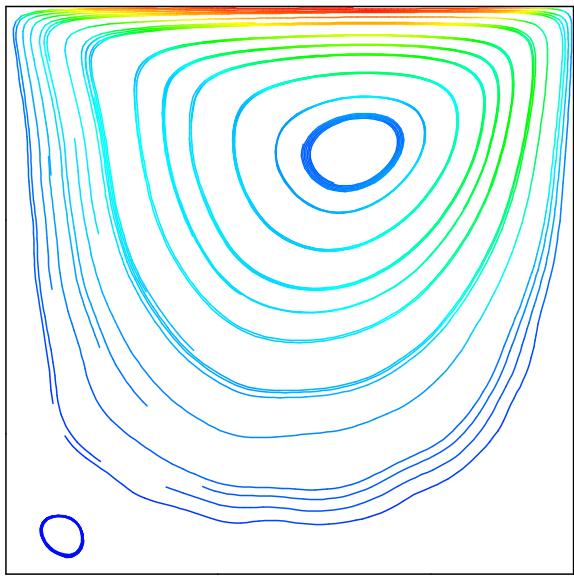


Fig. 11: Stream line at $Re=100$

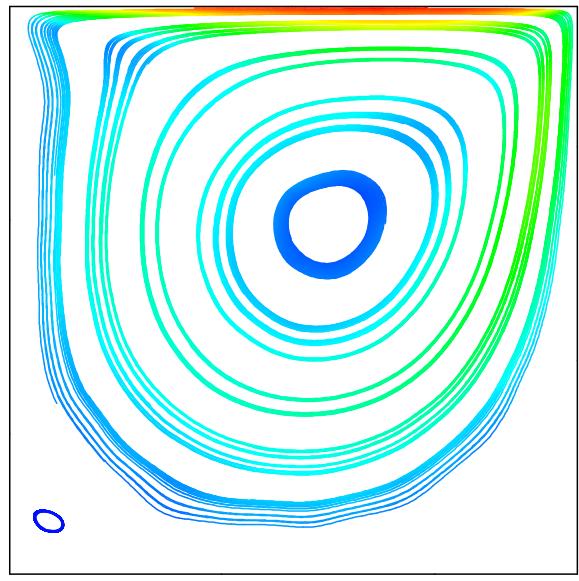


Fig. 13: Stream line at $Re=400$

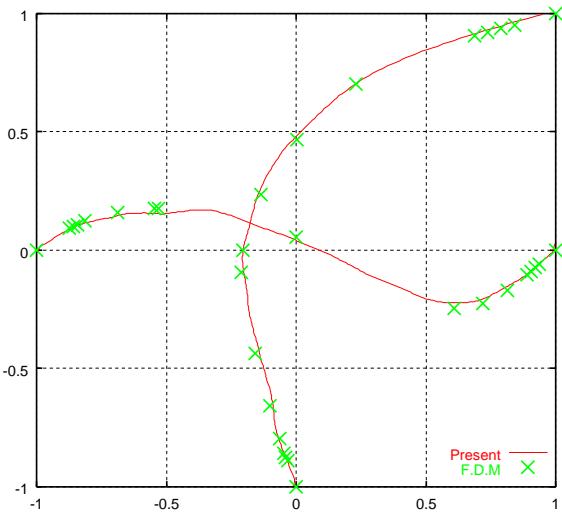


Fig. 12: Velocity profile at $Re=100$

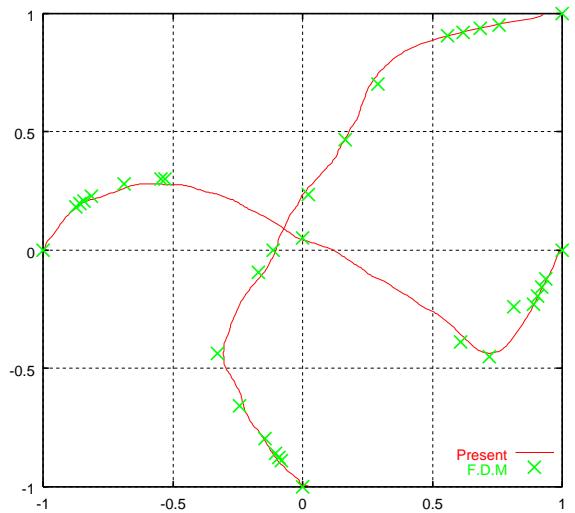


Fig. 14: Velocity profile at $Re=400$

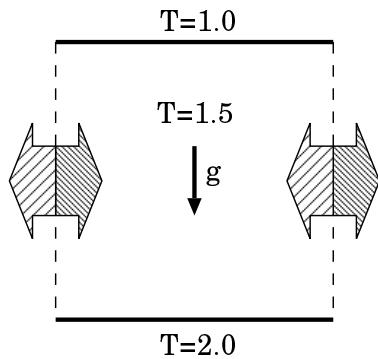


Fig. 15: Initial condition of Benard convection

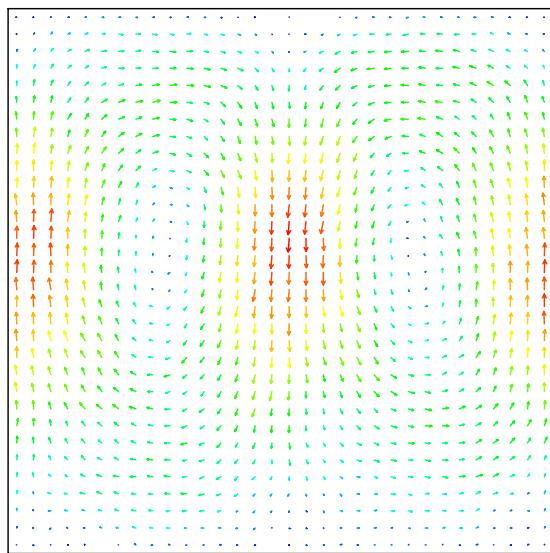


Fig. 16: Velocity field of Benard convection

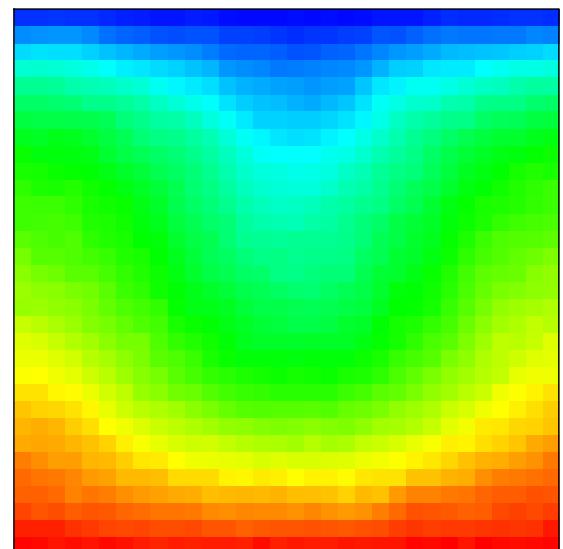


Fig. 17: Temperature field of Benard convection